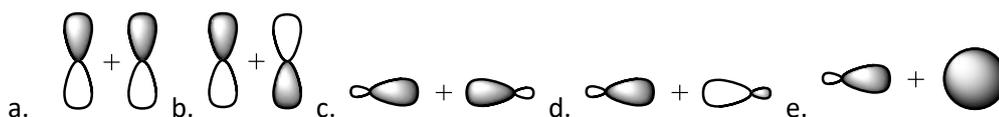


NHBQ007-22- Fundamentos de Química

Lista de Exercícios 3

1. Quais as principais diferenças entre a teoria de ligação de valência (TLV) e a teoria dos orbitais moleculares (TOM)? Quais as limitações de cada teoria? Quais as semelhanças e diferenças entre orbitais atômicos e moleculares? Qual a quantidade de elétrons que um orbital molecular pode aceitar?
2. Quais são os principais preceitos que devem ser considerados para a TOM? Descreva o processo de combinação de orbitais atômicos para formação de orbitais moleculares. Como os princípios de simetria e conservação de energia determinam quais orbitais atômicos podem se combinar? Quais são as principais vantagens de utilizar a TOM para descrever moléculas como o O_2 , ao invés de utilizar a TLV?
3. Indique quais orbitais moleculares são formados quando ocorre uma sobreposição dos orbitais abaixo:



4. Considerando uma molécula diatômica heteronuclear, como o N_2 , explique como o diagrama de orbitais moleculares é construído para esta molécula e como a ordem de ligação é determinada a partir deste diagrama. Qual é a implicação da ordem de ligação para a estabilidade da molécula?
5. Desenhe o diagrama de energia para as seguintes moléculas/íons abaixo. Para todos os casos, calcule a ordem de ligação para cada composto:
 - a. Cl_2
 - b. I_2
 - c. Li_2
 - d. Li_2^+
 - e. Br_2
 - f. B_2^+
 - g. Si_2
 - h. Sn_2
 - i. Pb_2
 - j. Ba_2
 - k. Ge_2
 - l. Te_2
 - m. Ne_2^{2+}
6. O que leva uma molécula apresentar propriedades de paramagnetismo e diamagnetismo? Determine se as moléculas abaixo apresentam paramagnetismo ou diamagnetismo.
 - a. O_2
 - b. O_2^+
 - c. O_2^{2-}
 - d. P_2
 - e. Si_2
 - f. S_2^-
 - g. S_2

7. Quais as relações entre ordem de ligação, comprimento de ligação e energia de ligação? De acordo com a TOM, o que se pode esperar das moléculas de Be_2 e Be_2^+ ? Estas moléculas existem? Justifique sua resposta baseado nos diagramas.
8. Qual a diferença entre o comprimento de ligação das moléculas de NO , NO^+ e NO^- ? Justifique sua resposta baseado nos diagramas de orbitais moleculares e na ordem de ligação de cada molécula/íon.
9. Determine a ordem de ligação e o comportamento magnético das seguintes moléculas/íons:
- | | |
|------------------|-------------------|
| a. LiH | d. OF^+ |
| b. CO | e. NeF^+ |
| c. NO^- | |
10. Quais são as configurações eletrônicas para as moléculas de CN^+ , CN e CN^- ? Calcule a ordem de ligação e indique as propriedades magnéticas de cada uma delas, evidenciando as moléculas que apresentam paramagnetismo.
11. Represente o diagrama de energia para as seguintes moléculas poliatômicas abaixo, determine a ordem de ligação das moléculas. Para cada uma das moléculas, prediga e indique a interação possíveis dos orbitais para a formação das ligações químicas:
- | | | |
|-------------------|-------------------------|--------------------|
| a. BeH_2 | d. H_2O | g. NO_2^- |
| b. CH_4 | e. NO_2 | |
| c. CO_2 | f. NO_2^+ | |
12. Explique como é formada a banda de valência na teoria de bandas. Como esta teoria prevê a existência de materiais condutores, semi-condutores ou isolantes?
13. O que é o processo de dopagem? Como ele altera as propriedades dos materiais?